

Programa rotor_1D

Fundamento:

Usa otra estrategia “más económica” que las diferencias finitas
Consideremos una base de estados $|u_j\rangle$, no necesariamente
vectores propios del hamiltoniano.

Buscamos los vectores propios del hamiltoniano, es decir los
coeficientes en:

$$|\phi_n\rangle = \sum_{j=1}^{\infty} c_{nj} |u_j\rangle$$

$$H|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle \Leftrightarrow \sum_{i=1}^{\infty} c_{ni} H|u_i\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} E_n c_{ni} |u_i\rangle$$

Multiplicando escalarmente por un $|u_i\rangle$, cualquiera de la base:

$$\sum_{j=1}^{\infty} c_{nj} \langle u_i | H | u_j \rangle = \sum_{j=1}^{\infty} E_n c_{nj} \langle u_i | u_j \rangle = E_n c_{nj} \delta_{ij}$$

Que es una **ecuación de autovectores de la matriz** $H_{ij} = \langle u_i | H | u_j \rangle$

Donde E_n son los autovalores y c_{nj} las componentes del
autovector correspondiente a E_n .

Solución numérica:

Si se resuelve el anterior problema, la solución no es una aproximación, sino la solución exacta, ...pero la inmensa mayoría de las veces la base es infinita y es difícil o imposible hacerlo, de forma cerrada, para todo n e i .

Solución: Cuando los coeficientes son despreciables excepto para un número dado de vectores de la base. Entonces el problema se reduce a diagonalizar una matriz, no demasiado grande.

Aún así es imposible analíticamente y se requieren métodos numéricos iterativos.

Vamos a emplear el llamado método de descomposición QR, que no es necesario aprender ahora, ya que nos lo resuelve una función de la librería gratuita EISPACK

Ejemplo concreto:

Consideremos un sólido rígido cuántico que puede rotar alrededor de un eje fijo (eje z) sometido a fuerzas externas.

Aparte del interés puramente teórico, el problema surge muy frecuentemente en la Física del Estado Sólido, al tratar sólidos que contienen grupos moleculares que pueden rotar alrededor del eje que los une al resto de la molécula como:

Metilo $-\text{CH}_3$

El potencial externo es electrostático y se debe a que el H tiene carga + y el resto de los átomos del sólido la tienen + o -

Y en 3D:

Amonio: NH_4^+

Hidrógeno sólido: H_2

Metano sólido: CH_4

El carácter fundamentalmente cuántico de la rotación se debe a que el grupo tiene un momento de inercia muy pequeño.

La ec. de Schrödinger independiente del tiempo es:

$$\left[-\frac{L_z^2}{2I} + V(\varphi) \right] \phi_n(\varphi) = E_n \phi_n(\varphi)$$

Vamos a tomar como **base las funciones de onda del rotor libre (caso $V=0$)**, que son las de L_z^2 , y que podemos tomar como:

$$u_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$$

Los elementos de matriz del hamiltoniano son:

$$H_{m_1 m_2} = \langle u_{m_1} | H | u_{m_2} \rangle = \frac{\hbar^2 m_1^2}{2I} \delta_{m_1 m_2} + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(m_2 - m_1)\varphi} V(\varphi) d\varphi$$

Vamos a calcular solamente las energías más bajas. Es decir, podemos limitar los valores de m_1 y de m_2 de modo que $m_1, m_2 \leq$ máximo fijado

La justificación es que si m es muy grande, la energía cinética, y por tanto la total es muy grande.

Las energías bajas corresponderán también a valores pequeños de m .

Programa Rotor_1D:

- Accesible libremente en web, tanto el .c como el ejecutable
- Usa la librería gratuita (licencia GNU) **EISPACK**
- Dibuja usando el programa también gratuito **GNU PLOT** (de no tenerlo instalado, el programa calcula las energías y funciones de onda pero no las dibuja)
- Los **autovalores** (números sin dimensiones) son las energías multiplicadas por el factor constante: $2I/\hbar^2$
- El **potencial** es fácil de cambiar pero como ejemplo se ha elegido:
$$V(\varphi) = -\left(\frac{\hbar^2}{2I}\right)V_0 \cos(n\varphi)$$
- Conviene poner un potencial simétrico respecto de φ para que los elementos de matriz sean reales.

Elementos de matriz del hamiltoniano (en las unidades elegidas)

$$H_{m_1 m_2} = \langle u_{m_1} | H | u_{m_2} \rangle = m_1^2 \delta_{m_1 m_2} - \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} [\cos(m_2 - m_1)\varphi] V_0 \cos(n\varphi) d\varphi$$

La energía cinética es diagonal

Los elementos de matriz del potencial se calculan

analíticamente con facilidad, pero en el programa se ha puesto la integral por trapecios para poder aplicarlo a un potencial cualquiera.

Para el potencial dado deben ser nulos excepto si

$$|m_2 - m_1| = n$$

Para la función de diagonalización es preferible numerar los vectores con índices $i, j = 0, 1, 2, \dots, n-1$ de modo que:

$$l \equiv \text{máx}|m_1|$$

$$m_1 = i - l; m_2 = j - l; n = 2l + 1$$

Diagonalización

La realiza la función de EISPACK:

```
rs ( n, a, w, matz, x )
```

n = dimensión de la matriz (comenzando en 0 = dimensión 1)

$a[n*n]$ = matriz en forma de array 1D listado por filas

$w[n*n]$ = autovectores por columnas

$x[n]$ = autovalores

$matz = 0$: obtener sólo autovalores

1: obtener autovalores y autovectores

Funciones de onda

La función (en lenguaje C) `rs(n, a, w, matz, x)` obtiene los coeficientes $c_{ki} = w[i+k*n]$ del autovector que corresponde a la energía E_k .

La función de onda se obtiene realizando la superposición lineal de las de la base escogida:

$$\phi_k(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=0}^n c_{kj} e^{i(j-l)\varphi} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=0}^n c_{kj} \{ \cos[(j-l)\varphi] + i \sin[(j-l)\varphi] \}$$

Con $V(\varphi)$ simétrico y este cálculo $\phi_k(\varphi)$ puede ser real o imaginaria pura (se puede multiplicar por un factor de fase global para que sea siempre real)

Resultados

El programa lista **por pantalla**:

- * Orden de la matriz $(2l+1)$
- * Autovalores (energías multiplicadas por $2l/\hbar^2$)
- * Coeficientes c_{ki} de las funciones de onda comprendidas entre nfun1 y nfun (por defecto 0 y 1)
- * Funciones de onda $\phi_k(\varphi)$

En **archivos de salida**:

Crea los archivos de texto:

R_1D_fun.gnp

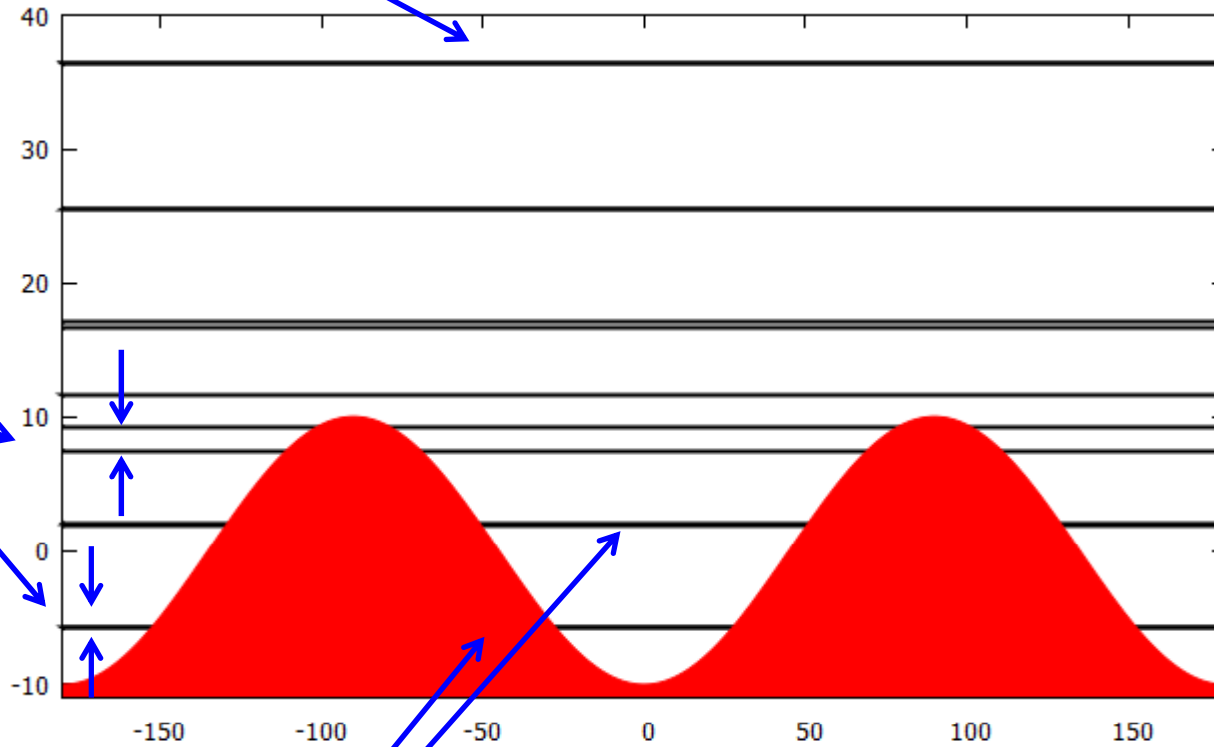
R_1D_levels.gnp

Que contienen el potencial, las funciones de onda y las energías, en un formato que puede dibujar directamente GNUPLOT (`load "R_1D_levels.gnp"`), o que se puede exportar fácilmente a otras aplicaciones

Caso interesante: $V = -10 \cos(2\varphi)$

Aprox "Rotor libre"

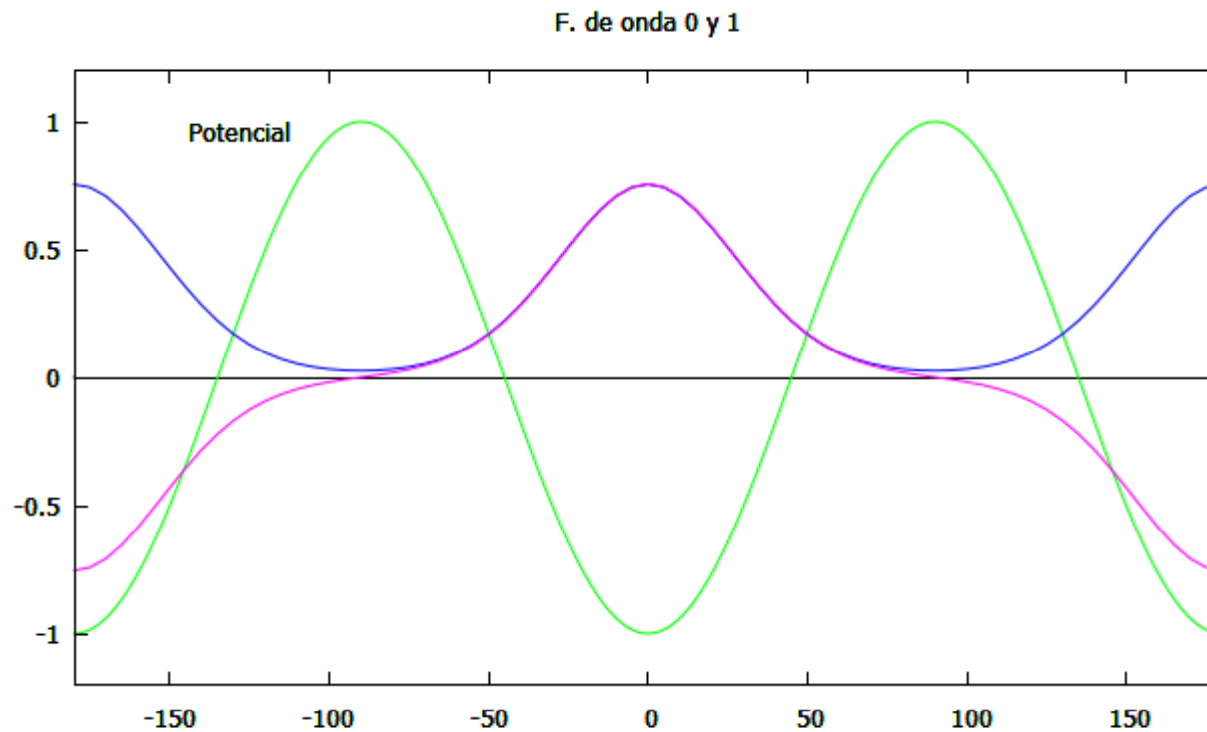
"Tunnel splitting"



Aprox "Oscilador armónico" (comprobar con los datos numéricos)

Funciones de onda de menor energía:

Son dos , parecidas a la del oscilador armónico pero no exactamente degeneradas, sino desdobladas ligeramente en dos niveles próximos por efecto túnel



Una función es simétrica y otra antisimétrica

Ambas tienen probabilidades iguales de que la partícula esté en cualquiera de los dos pozos

Una función que represente la situación de la partícula en un solo pozo es una combinación lineal de las dos, y no es de energía perfectamente definida

Por ejemplo una partícula cercana al pozo a) $\varphi = 0$ con la mínima energía posible está representada por la F. de O.

$$\psi(\varphi)_a = \frac{1}{\sqrt{2}} \{\phi_0(\varphi) + \phi_1(\varphi)\}$$

Y una partícula cercana al pozo b), $\varphi = 180^\circ$

$$\psi(\varphi)_b = \frac{1}{\sqrt{2}} \{\phi_0(\varphi) - \phi_1(\varphi)\}$$

Ya no es necesario cálculo numérico para comprobar que si en $t=0$ está en el estado ψ_a , su evolución temporal es entre los estados ψ_a y ψ_b con una frecuencia

$$\omega_t = \frac{E_1 - E_0}{\hbar}$$

que se llama frecuencia de tunnelling. Este efecto se usa para los relojes atómicos

Algunos ejercicios:

1. *Para los datos del programa calculado, determinar las energías en la aproximación de oscilador armónico y comparar con las obtenidas por el programa (ver el listado).*
2. *Dibujar las dos funciones de onda de menor energía junto con las obtenidas con la aproximación de oscilador armónico.*
3. *Ejecutar el programa para un metilo ($n=3$) con $V_0=-10$. Tomando la lista de autovalores, calcular la frecuencia de tunnelling. En este caso el multiplete fundamental lo forman 3 estados.*